



TITLE:

30.溶液層を伴ったWhisker成長のシミュレーション(東京理科大学大学院理学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1989年度))

AUTHOR(S):

吉田, 輝人

CITATION:

吉田, 輝人. 30.溶液層を伴ったWhisker成長のシミュレーション(東京理科大学大学院理学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1989年度)). 物性研究 1990, 54(6): 756-756

ISSUE DATE:

1990-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94168>

RIGHT:

30. 溶液層を伴った Whisker 成長のシミュレーション

吉 田 輝 人

Whisker(ひげ結晶)は 特異な形状からその成長機構に興味を持たれている。今回、異種基盤上に広がった溶液層中で溶媒の蒸発によって析出・成長する単純立方格子の結晶について、その形状が等方的なものから Whisker 状へと変化する成長初期の過程についてシミュレーションを行った。

結晶は $\{100\}$ 面で囲まれた直方体で、その一面が基盤に接しており、らせん転位などの転位は存在しないものとした。成長は二次元核生成によるものとし、さらに結晶面における拡散も考慮に入れた。溶媒の蒸発の成長への影響については、結晶界面近傍の過飽和度について、溶液層表面での溶媒の蒸発(溶液の濃縮)によって生じた過剰溶質粒子が溶液中をランダムウォークにより結晶面へ到達するという形で評価した。結晶との親和性から、溶液層は結晶の成長と共に盛り上がる。溶媒の蒸発率は溶液層表面の曲率に依存しており、結晶上部の溶液層表面でさらに蒸発が進み、結晶が成長する。これらの仮定のもとに、結晶の成長の異方性について調べた。

液中拡散速度と蒸発速度の関係から、二次元核生成が単一核生成であって成長速度の異なる場合 および 多核生成の場合のそれぞれについてシミュレーションを行った。その結果、単一核生成で成長速度が速い場合には、結晶の頂面の成長の方が優勢となり結晶が角柱状に変化し Whisker としての成長を開始し得る との結論が得られた。この場合、Whisker の太さは溶液層の厚みで決まる。初期の結晶が立方体でなく平板状であったとしても充分 Whisker として成長し得る軸比が得られた。これに対し、蒸発が非常に遅い場合、あるいは逆に蒸発が非常に速い場合には、いずれも成長の異方性は減少する。とくに、蒸発が非常に速く多核生成と考えられる場合には、成長はほぼ等方的になった。これらの結果は実験の示唆するところと一致する。